

修士論文の和文要旨

| | | | | | |
|---|------------------------------------|-----|--------|------|---------|
| 大学院 | 電気通信学 | 研究科 | 博士前期課程 | 電子工学 | 専攻 |
| 氏名 | 伊藤 潤 | | | 学籍番号 | 0532007 |
| 論文題目 | 酸素ドーピンググラフェンの原子配列の双安定性と電子状態の第一原理計算 | | | | |
| <p>要 旨</p> <p>グラファイトは酸化することで層間に酸素原子が入り込み酸化黒鉛ができる。近年、酸化黒鉛を精製する過程において炭素平面内にひび割れが生じることが報告されている。グラファイトの酸化の初期過程において形成される epoxy 基が一行に配列することにより ether 基に変換されることで炭素原子間結合が壊れ、ひび割れが生じる可能性が理論的に示されたが、その構造変化機構については不明な点が多い。本研究ではグラフェンシートに酸素原子が吸着した際の構造変化の機構と電子状態を解明することを目的とする。</p> <p>c-c 間 bridge サイトへ酸素原子を連続に列状に配置した場合と等方的に配置した場合について、いくつかの酸素吸着量に対するモデル考えた。列状配置についてはグラフェン面の片側のみに吸着した場合と両側に交互に吸着させた場合の2つの場合について考え、等方的配置では片側吸着を仮定した。各モデルについて密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、格子定数を変化させながら原子構造の最適化を行い、エネルギーの変化について計算を行った。</p> <p>列状配置・等方配置共にある吸着量範囲で epoxy 構造と ether 構造の2つの安定構造が現れ、列状配置では ether 構造が、等方配置では epoxy 構造がより安定な構造となることがわかった。さらに、列状配置において酸素列間のグラフェン幅を広くした方が、また両側吸着の方が epoxy 構造から ether 構造に構造変化するためのエネルギー障壁が小さくなることがわかった。これはグラフェンに生じる歪みを緩和しやすくなるためである。また、同様の理由により片側構造より両側構造が安定となる。片側構造から両側構造を形成するための活性化エネルギーは非常に小さく、片側吸着により ether 構造を形成した場合にも容易に両側構造に構造変化すると考えられる。</p> <p>以上からひび割れの前駆状態である c-c 間距離の広がった ether 構造が形成される条件として</p> <ul style="list-style-type: none">• 酸素原子がグラフェン表面で間隔を空けずに列状に配置していること。• 酸素原子列同士の間隔が十分空いているか又は両側に配置されていること。 <p>が重要な要因であることがわかった。ether 構造が形成された場合にはグラフェンの歪みを緩和するようにグラフェン平面が酸素原子列で折れ曲がった構造をとる。</p> <p>電子状態に関しては、ether 構造はグラフェンと同様に金属的な電子構造を持つが、epoxy 構造では半導体的な電子状態が現れることがわかった。</p> | | | | | |